

気体分子運動のシミュレーションとその可視化

清 野 大 樹*

A Kinetic Simulation and 3D Visualization of Gases

Daiju SEINO

Abstract

Kinetics of gases have been simulated, in which ones is assumed rigid sphere and body to body collision is perfectly elastic. Three kinds of simulations are performed, (i) thermal equilibrium, (ii) free expansion and (iii) mixture of gases of different temperature. We have visualized these simulation by Java 3D. It is concluded that the stereo projections are good well revealed gases state changing to thermal equilibrium, velocity components distribution expands to tail, and however as fluctuation are large.

Keywords: Rigid Body Collision, Collision Simulation, Velocity Distribution, Thermal Equilibrium, Free Expansion, Mixture of Gases

1. はじめに

近年パソコンの性能が向上し科学計算が汎用計算機を使わなくても可能となった。また、3次元アニメーションのソフトも充実し手軽に利用できるようになった。このような高速処理と3DCGの環境は研究と教育に大きな影響を及ぼしている。自然現象を再現する場合も、実験装置を使わなくても3Dアニメーションで再現すれば、いろいろな角度から観察でき、またスローモーションや早送りなどにより、多角的に現象を理解することができる。

気体の分子運動は現実には目で見ることはできない。しかし、3Dアニメーションを使うと仮想的に装置を拡大して気体分子の運動の様子を視覚化することができるようになる。われわれは、気体分子の運動について次の3つの現象のシミュレーションと3Dアニメーション化を試みた。

① 乱れた状態から熱平衡状態への変化

平成17年12月16日

* システム情報工学科・教授

② 自由膨張

③ 温度の違う同一気体の混合

3Dアニメーション化にはJava 3Dを使用する。この言語は、スタンドアローンでも使用でき、またWebでも公開できる利点がある。

2. 剛体球の衝突

ここで扱う球はすべて大きさと質量が同じの球とする。球は壁面に衝突する場合と他の球に衝突する場合がある。壁面との衝突は6つの面との衝突を考慮する。他の球との衝突は、3つ以上の球が同時に衝突する場合もありえるがその確率は非常に小さいので、2球間の衝突だけを扱う。球は変形しない剛体球とする。壁や他の球との衝突は完全弾性衝突、すなわち衝突前後でエネルギー保存則が成り立つとする。

2.1 壁面との衝突

球が壁に衝突する場合、球の速度は衝突の前後で壁面に垂直な成分だけが反対向きになる。図1に示すように、壁面Aに衝突する前の球の

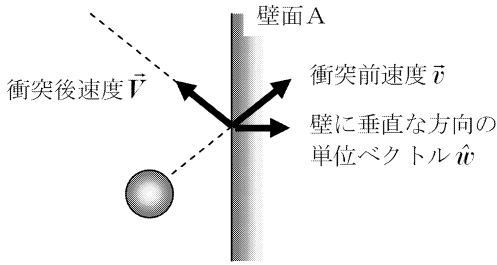


図1 球と壁面との衝突
壁に垂直な方向の速度成分は $\vec{v} \cdot \hat{w}$

速度を \vec{v} とする。壁面 A に垂直で外向きの単位ベクトルを \hat{w} とすると衝突前の \hat{w} 方向の速度の大きさは $\vec{v} \cdot \hat{w}$ であるので、衝突後の球の速度 \vec{V} は、

$$\vec{V} = \vec{v} - 2(\vec{v} \cdot \hat{w})\hat{w} \quad (1)$$

で与えられる。衝突後の \vec{V} の x, y, z 成分は、式 (1) より衝突前の \vec{v} と \hat{w} の成分から求めることができる。

2.2 2つの球の衝突

2つの剛体球が完全弾性衝突するとき、衝突前後での2球の速度は、2球の中心を結ぶ方向の速度だけが入れ替わる。2球を i, j とし、衝突時の位置をそれぞれ \vec{r}_i, \vec{r}_j 、衝突前の速度をそれぞれ \vec{v}_i, \vec{v}_j とする(図2参照)。球 i の中心から j の中心方向の単位ベクトルは

$$\hat{d} = (\vec{r}_j - \vec{r}_i) / |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$$

である。壁との衝突の類推から解るように、衝突直前の球 i の \hat{d} 方向の速度の大きさは $\vec{v}_i \cdot \hat{d}$ であるので、衝突後の速度 \vec{V}_i は、

$$\vec{V}_i = \vec{v}_i - (\vec{v}_i \cdot \hat{d})\hat{d} + (\vec{v}_j \cdot \hat{d})\hat{d} \quad (2)$$

同様に、衝突後の速度 \vec{V}_j は、

$$\vec{V}_j = \vec{v}_j - (\vec{v}_j \cdot \hat{d})\hat{d} + (\vec{v}_i \cdot \hat{d})\hat{d} \quad (3)$$

となる。式(2)と(3)から、運動量保存則 $\vec{V}_i + \vec{V}_j = \vec{v}_i + \vec{v}_j$ およびエネルギー保存則 $V_i^2 + V_j^2 = v_i^2 + v_j^2$ が成り立っていることを容易に示すことができる。

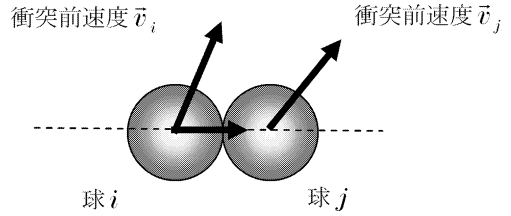


図2 球 i と j の衝突
球の中心を結ぶ方向の2球の速度が衝突で入れ替わる

衝突後の速度 \vec{V}_i と \vec{V}_j の x, y, z 成分は、 \vec{v}_i, \vec{v}_j と \hat{d} を成分で表し、式 (2) と (3) から求めることができる。

3. 気体分子運動シミュレーションの方法

容器は立方体、1辺の長さは10+球の直径。球の半径は0.1、したがって、球の半径は容器の1辺の長さの約1/100である。球の数は①と③のシミュレーションでは512個、②では256個である。

初期条件は、容器内に均一に分布するように初期位置を設定する。球の初速度の x, y, z 成分は乱数で与える。時間を少しずつ一定間隔で変化させ、球を微小移動させる。1回の移動の最大値は球の直径の約1/1,000である。1回の移動で、壁との衝突、他球との衝突を調べ、衝突が起っていれば速度を前節に従って処理する。球間の衝突回数で全行程を決める。

球の位置を決めるとき、微小な移動距離の和を求めた後に元の位置を加えるという方法を採用した。この方法により誤差を少なくすることができる。

4. 気体分子運動シミュレーションの結果

① 熱平衡状態シミュレーション

図3は x 軸方向の速度分布である。速度成分を乱数で与えたため初速度の成分はほぼ均等に分布する(図3(a))。他の y, z 軸方向の速度分布もこれと似たものとなる。気体分子1個当たり

平均で 3.9 回衝突した後(全衝突回数 1,000 回の後) の速度分布は図 3(b) に示すように速度の両側に広がっていく。

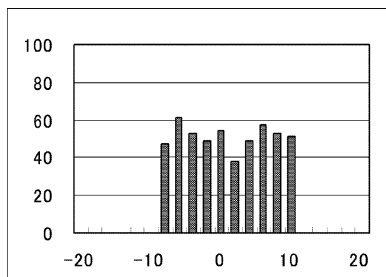


図 3 (a) x 軸方向の初期速度分布

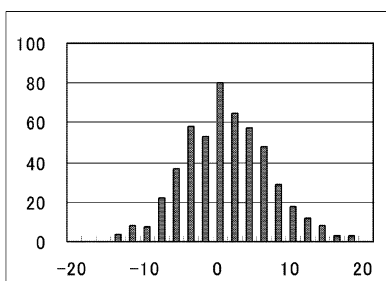


図 3 (b) 気体分子 1 個当たり 3.9 回、衝突回数 1,000 回後の x 軸方向の速度分布

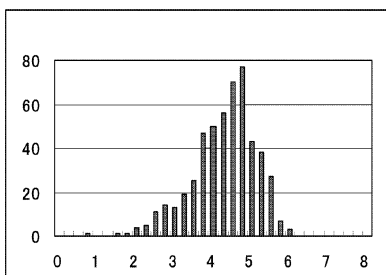


図 4 (a) 初期速度分布

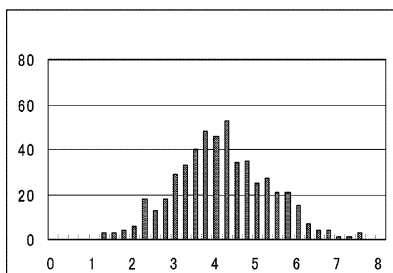


図 4 (b) 図 3(b) と同じ時間に於ける速度分布

② 自由膨張シミュレーション

左の容器内で球と球が 2,000 回衝突した後、真中の壁を取り外し右の容器に自由膨張させている。自由膨張後は 3,000 回の球対球の衝突をさせている。

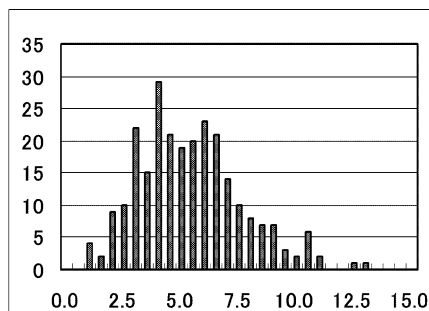


図 5 (a) 自由膨張開始時の速度分布

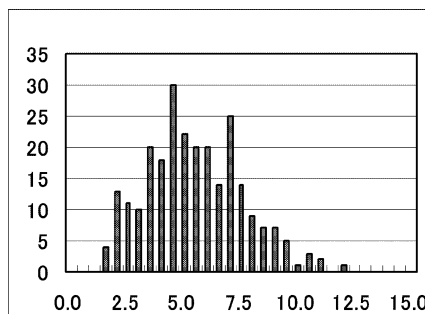


図 5 (b) 自由膨張が進んだ状態の速度分布

③ 気体混合シミュレーション

片側に気体を入れて運動させる。他の片側には静止した気体（絶対 0 K の気体に相当する）を入れる。運動している気体が 2,000 回衝突した後，静止した気体と混合させて 4,000 回衝突させる。

混合が開始したときの速度分布図 6(a) では速度 0 の分布があるが，徐々にこのピークが低くなり，4,000 回衝突には図 6(b) きれいな分布を示す。

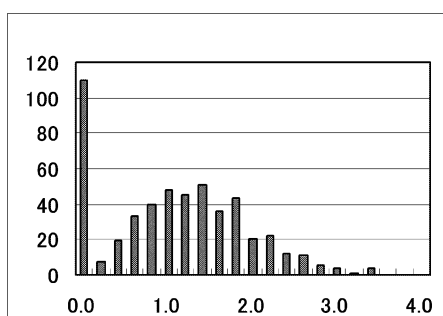


図 6 (a) 混合開始時の速度分布

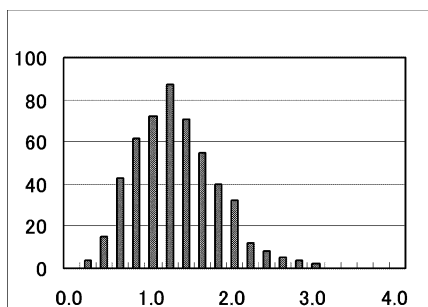


図 6 (b) 混合が進んだ状態の速度分布

5. 気体分子運動の 3D アニメーション

① 熱平衡状態への遷移

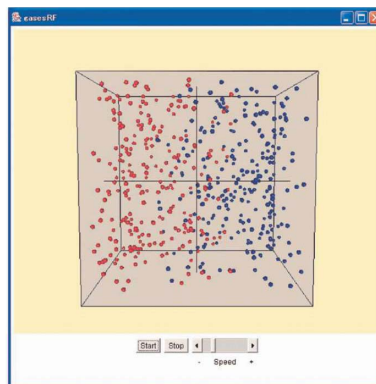


図 7 (a) 熱平衡への遷移
左側(赤)と右側の分子(青)が混ざり合っていく様子

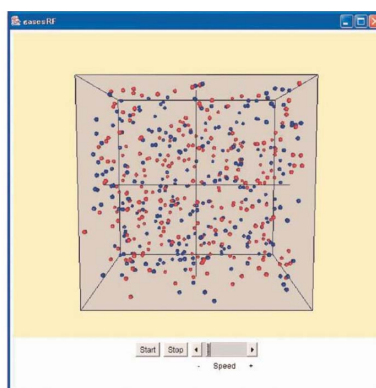


図 7 (b) 気体分子が混合した状態

② 自由膨張

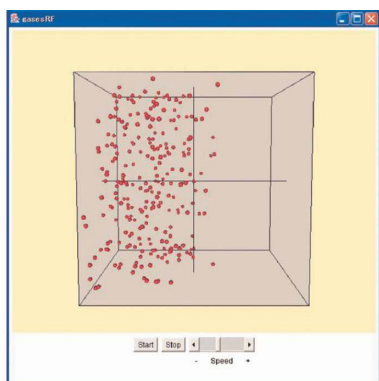


図 8 (a) 自由膨張
初期状態

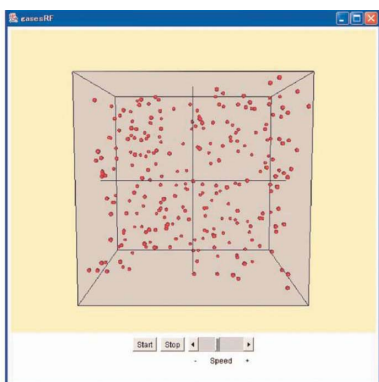


図 8 (b) 自由膨張
左側の領域から右側へ自由膨張した状態

③ 混合気体

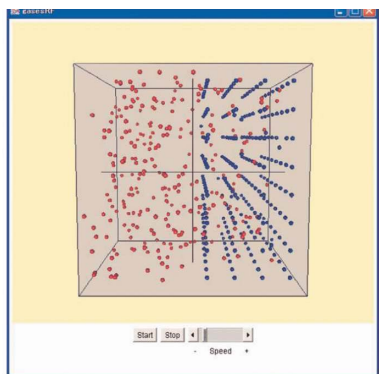


図 9 (a) 混合気体
初期の状態

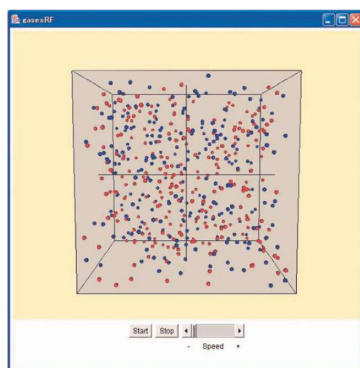


図 9 (b) 混合気体
左側の運動している分子 (赤) が右側の静止している分子 (青) に衝突しながら平衡状態に遷移した状態

6. 気体分子運動論と シミュレーション結果の比較

実在の気体は、1 mol で 22.4 ℓ，したがって気体分子 1 個当たりの体積は $3.72 \times 10^{-26} \text{ m}^3$ 。気体分子の大きさをボア半径の球とみなすと、気体分子 1 個当たりの体積に対する気体分子 1 個が占める体積の割合は 1.67×10^{-5} である。ここで使用したモデルにおける気体分子が占める体積密度は、1 mol 22.4 ℓ の場合に比べて 120 倍大きい。

1 mol 22.4 ℓ の気体と同等の密度にするためには球の半径を現在の 10 分の 2 にしなければならない。この大きさで精度良く計算するには多大の計算時間を要する。

7. ま と め

ここで取り扱った剛体球による気体分子運動のシミュレーションは、気体分子が混じりあっていく様子を視覚的に捉えることができる。しかし、揺らぎが大きく安定した Maxwell 分布を得ることができなかった。これを解決するには、球の大きさを小さくして密度を保ったまま球数を増やす必要がある。そのためにはもっと高性能なパソコンの実現が必要であろう。